

INTRODUCCIÓN A GAUSSIAN PARA ANÁLISIS DE COMPUESTOS ORGÁNICOS

Para uso en el cluster LNS-Knights Landing

Fernando Robles Morales
Judith Percino Zacarías

ISBN: 978-607-525-720-4



9 786075 257204



BUAP

Primera edición 2020
ISBN: 978-607-525-720-4

D.R. © Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

4 sur 104, Col. Centro, Puebla, México. C.P. 72000

Teléfono 01 (222) 2295500

www.buap.mx

Dirección General de Publicaciones

2 norte 1404, Col. Centro, Puebla, México. C.P. 72000

Teléfono 01 (222) 2295500 Ext. 5768

www.publicaciones.buap.mx

Este libro fue sometido a un riguroso proceso de dictaminación a doble ciego, por dos dictaminadores externos a la BUAP.

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

Rector: Alfonso Esparza Ortiz

Secretaría General: Guadalupe Grajales y Porras

Director General de Publicaciones: Hugo Vargas Comsille

INTRODUCCIÓN A GAUSSIAN PARA ANÁLISIS DE COMPUESTOS ORGÁNICOS













Para uso en el cluster LNS-Knights Landing

**Fernando Robles Morales
Judith Percino Zacarías**

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

2 0 2 0

CONTENIDO


Presentación	6
Introducción	8
Uso de Gaussian en cluster KNL	11
Preparación de moléculas por analizar	11
Uso de Molview   	12
Uso de Chemdraw 	13
Uso de Chemdraw   	15
Subir archivo de datos de moléculas hacia el cluster KNL	18
Uso de Cyberduck  	18
Uso de MobaXterm 	23
Uso de SSH Client  	27
Uso de Gaussview para definir cálculo DFT	28
Someter trabajo de cálculo DFT en Sistema de Colas Torque	36
Visualizar resultados en Gaussview	41
Visualizar Homo-Lumo	43
Visualizar frecuencias	47
Conclusiones	51
Referencias	56


USO DE GAUSSIAN EN CLUSTER KNL

En este libro se describen los pasos para realizar cálculos Ab Initio en moléculas por medio del software *Gaussian*.


PREPARACIÓN DE MOLÉCULAS POR ANALIZAR

Existen varios softwares para crear la edición de una molécula a analizar, a partir de un diagrama se puede describir en el paquete *Chem-Draw*, *molview.org*.

En caso de tener los datos de la molécula a analizar en algún otro formato de archivo, puede continuar desde la subsección **verificación archivo molécula** con *Mercury* 

En caso de tener los datos de la molécula a analizar en el formato .gjf de *Gaussian* continuar desde la sección **subir archivo de datos de moléculas hacia el Cluster KNL**.

USO DE MOLVIEW

Por ejemplo en la página *molview.org* se puede editar un archivo de molécula .mol como se muestra en la **Figura 1**.

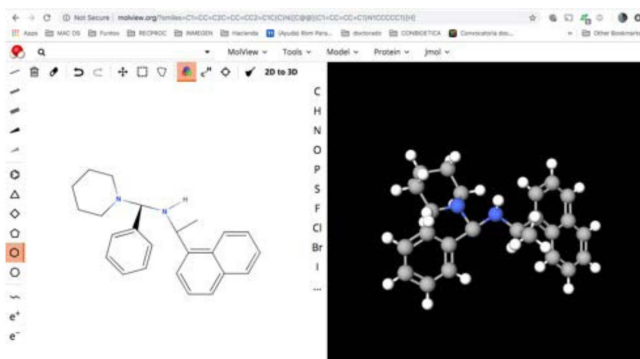





Figura 1.
Edición de datos de molécula en MolView.

Después de editar la molécula, dar click en **Tools**, después en **MOL File**, para guardar el diagrama de la molécula en formato .mol. Cuando se da click en  **MOL File** automáticamente se descarga el archivo .mol de la página, como se muestra en la **Figura 2**.

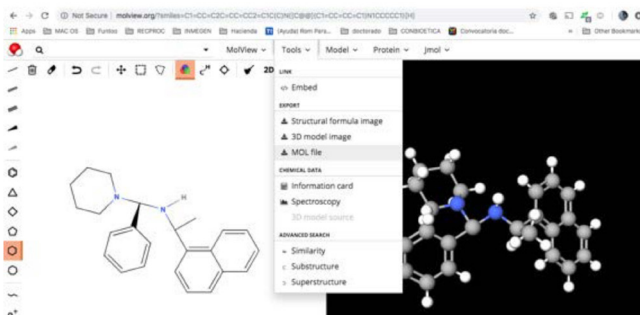


Figura 2

Dar click en el menú superior izquierdo en **Open conection**, para escoger el tipo de sesión para conectarse al servidor KNL, después en la pestaña superior seleccionar en la lista desplegable **SFTP** . Como se muestra en la **Figura 9**.

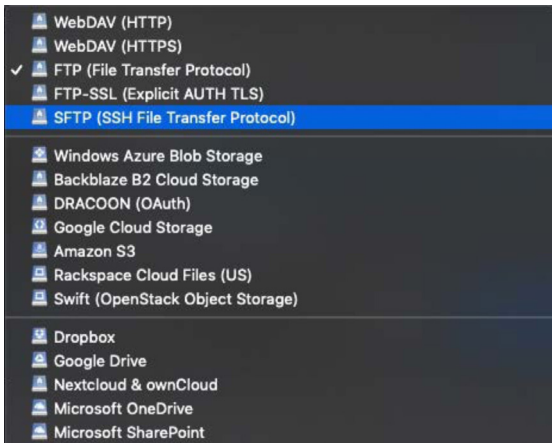
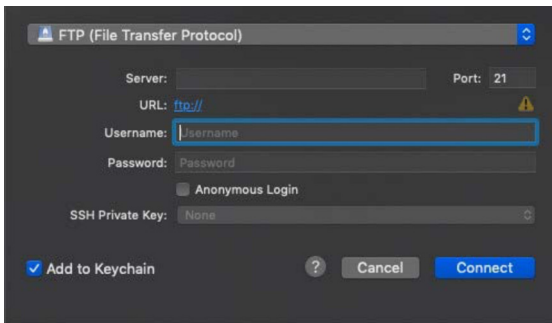


Figura 9.
Crear Conexión SFTP
al servidor KNL.

Una vez seleccionado el tipo de conexión, se procede a colocar la dirección IP del servidor KNL **148.228.4.17**, y especificar el usuario con el que se va a acceder, tal como se muestra en la **Figura 10**.